

X線回折法 (XRD : X-Ray Diffraction) の紹介

1. X線回折の原理

X線とは

波長の短い (1Å位) 電磁波です。

結晶とは

周期的な原子配列を有する固体です。



原子間距離とX線の波長が同程度 (1Å位) のため、結晶構造の情報を得ることができます。

Braggの条件： $2d \sin\theta = n\lambda$

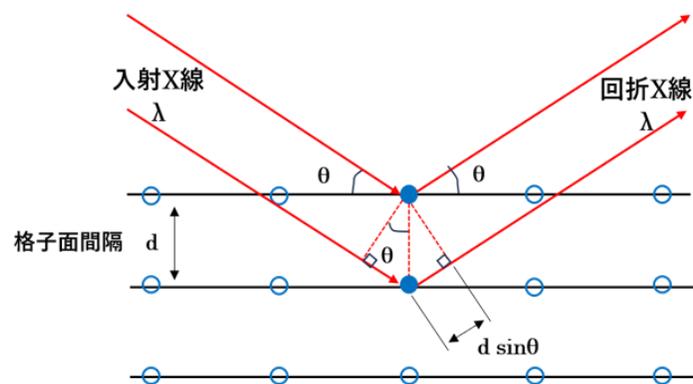


図1 X線回折の原理

格子面間隔dの格子面によって散乱するX線の光路差「 $2d \sin\theta$ 」が、入射X線の波長λの整数倍 (n) と等しい時に干渉が起こり、特定の方向 (θ) でのみX線が観測されます。

2. 粉末X線回折法による定性分析

① 結晶相を同定できます。

データベースを参照し、試料に含まれる結晶相を決定します。

結晶多形の区別が可能となります。例：二酸化チタン (ルチルとアナターゼ)

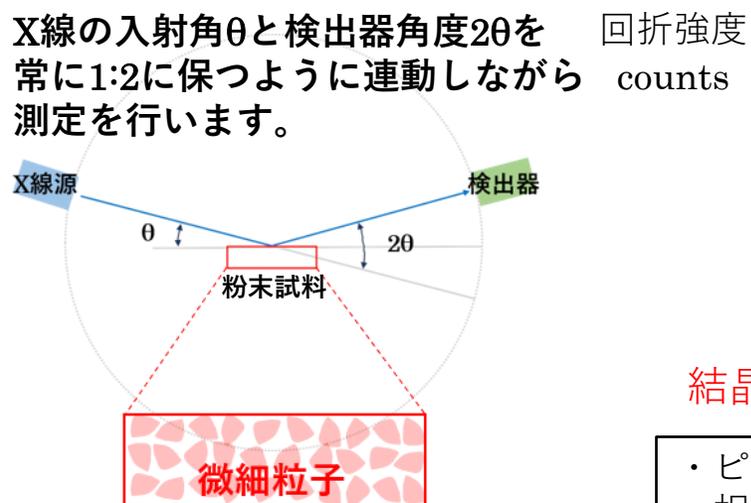
* データベースに収録されていない物質は同定できません。

② 結晶状態を判別できます。

結晶性の物質であれば、複数の鋭いピークが現れます。

* 非晶質の場合は、ブロードなピークが現れます。

X線の入射角θと検出器角度2θを常に1:2に保つように連動しながら測定を行います。

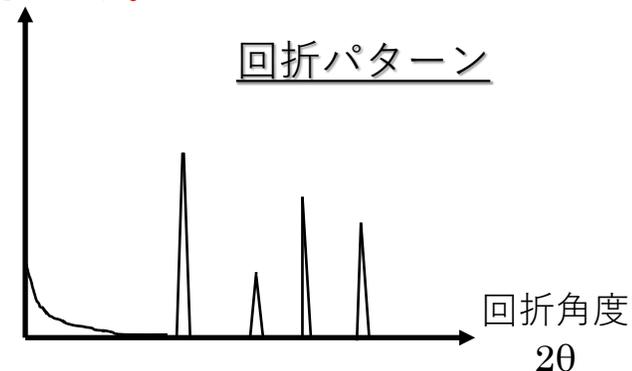


* 微細粒子はランダムな向きで試料中に存在します

図2 粉末X線回折法

回折強度
counts

回折パターン



結晶構造に関する情報が得られる

- | | | |
|-----------|---|--------|
| ・ ピーク位置 | ⇒ | 格子定数 |
| ・ 相対ピーク強度 | ⇒ | 原子位置 |
| ・ 半値幅 | ⇒ | 結晶子サイズ |

図3 粉末X線回折による回折パターン